BEM & Mie

il BEM-boundary element method è un approccio computazionale per risolvere le equazioni di Maxwell per nanoparticelle metalliche immerse in un dielettrico, "il problema di Mie".

I metodi computazionali sviluppati per risolvere le equazioni di Maxwell non sono stati sviluppati per risolvere problemi di plasmonica: DDA-discrete dipole approximation fu sviluppato per il calcolo dello scattering da grani di grafite interstellare, FDTD-finite difference time domain fu sviluppato per la soluzione generale delle equazioni di Maxwell, così per le Dyadic Green Functions, ed il metodo a multipoli multipli.

Il calcolo elettrodinamico esatto per cluster metallici sferici in regime quasistatico (particelle sufficientemente piccole 2r<< lambda) è stato effettuato da Mie nel 1908. Mie risolse le equazioni di Maxwell con appropriate condizioni al contorno in coordinate sferiche usando una espansione multipolare del campo elettrico e magnetico incidenti. I parametri in ingresso sono la dimensione della particella e le funzioni ottiche della particella materiale e del mezzo circostante. La derivazione di Mie fu ridotta da Born nel suo libro "ottica", ed un formalismo più matematico fu introdotto da Stratton, quest'ultimo è diventato più comune della versione originale di Mie. Il proposito di Mie era di descrivere l'assorbimento ottico e lo scattering della luce da parte di un cluster, e nello specifico capire gli spettri di estinzione degli esperimenti di Steubing. La soluzione di Mie divide il problema in due parti: la parte elettromagnetica-trattata con principi primi-ed il problema del materiale che viene fatto introducendo una funzione dielettrica fenomenologica epsilon(omega, R) che può essere presa dagli esperimenti o da calcoli basati su modelli. La teoria di Mie è di carattere fenomenologico e non dà visione fisica delle proprietà del materiale come il moto degli elettroni dentro la particella metallica o la presenza eventuale di autostati discreti (QSE-quantum size effects). 60 anni dopo la teoria di Mie, in particolare l'assorbimento, fu interpretata con concetti di eccitazioni collettive di oscillazioni plasmoniche di differente ordine multipolare. Queste per la precisione si dovrebbero chiamare "plasmon polaritons", per differenziarle dai "free plasmons" che vengono eccitati da elettroni. Questa notazione sembra dovuta a Schopper. Questi calcoli di Mie sono ristretti a cluster neutri elettricamente.

Debye risolse lo stesso problema di Mie quasi contemporaneamente, da un punto di vista diverso. Debye calcolò la pressione della luce (o pressione di radiazione), cioè la pressione meccanica su una piccola particella dovuta all'interazione con la luce (campo em). Questa risulta incommensurabilmente piccola all'epoca, mentre gli spettri di estinzione erano facili da ottenere, e la soluzione di Debye non ebbe la notorietà di quella di Mie. Al giorno d'oggi, con l'avvento dei laser la cose sono cambiate e le particelle anche in cluster possono essere spostate da un fascio di questa luce.

Kreibig & Vollmer, Optical properties of metel clusters, Springer 1995

Metodi di calcolo del "problema di Mie"

1- BEM: boundary element method

E' un metodo di calcolo/soluzione delle equazioni di Maxwell in presenza di interfacce dielettriche nette di forma arbitraria in termini di integrali di superficie che coinvolgono le cariche di interfaccia e le correnti, che agiscono come sorgenti del campo elettromagnetico indotto dal campo esterno.

Il BEM consiste nel determinare in maniera autoconsistente queste superfici/distribuzioni di interfacce per un determinato campo em esterno.

Si devono risolvere in maniera autoconsistente gli integrali di superficie con una procedura numerica.

Si esprime in maniera tridimensionale la dipendenza dei potenziali scalare e vettoriale in termini delle espressioni degli integrali di superficie.

La sola assunzione, comune a tutti i metodi di calcolo è che i differenti mezzi coinvolti nelle strutture in esame, siano descritti da una frequency dependent local dielectric function e terminino con interfacce nette.

2- DDA: discrete dipole approximation

Vale per geometrie arbitrarie e anche per incorporare effetti di ritardo. E' nota anche come coupled dipole-dipole method. Fu introdotto per la prima volta da Purcell & Pennypacker nello studio delle proprietà ottiche di grani dielettrici (polvere interstellare) e più tardi fu applicato a self standing spheres e a due sfere vicine.

Questo metodo richiede un calcolo numerico intensivo perchè sostanzialmente modellizza il campione con un array di dipoli distribuiti su tutto il volume e accoppiati l'uno con l'altro.

Ha il vantaggio che può essere applicato a geometrie complesse e a nanostrutture di carbonio (nella versione non ritardata) assegnando un dipolo ad ogni atomo di carbonio, con la polarizzabilità aggiustata per riprodurre il responso della grafite.

3-FDTD: finite difference time domain

E' un metodo essenzialmente bidimensionale. Pendry & coworkers hanno incorporato gli effetti di ritardo e sviluppato il metodo per ottenere curve di dispersione ed energy losses in periodic dielectric arrays. Risolsero le equazioni di Maxwell partendo dai campi elettrico e magnetico su un certo piano e propagarono quindi i campi a consecutivi piani paralleli finchè non fosse coperta l'intera cella unitaria dell'array. Costruirono in questo modo una matrice di trasferimento.

Le proprietà spettrali in FDTD methods sono ottenute dalla trasformata di Fourier dei campi calcolati.

Questi metodi hanno una convergenza lenta con sistemi ad alta costante dielettrica o thin skin depht.

4-Multiple scattering techniques

Progettate per risolvere le equazioni di Maxwell in presenza di cluster dielettrici, riducendo il problema alla conoscenza delle proprietà di scattering dei costituenti individuali.

Questi metodi richiedono matrici di scattering dei cluster costituenti come input. Queste matrici hanno espressioni analitiche solo per geometrie semplici quali sfere e cilindri.